

01;05;07;10

©1994 г.

О МОДЕЛИ ИЗЛУЧЕНИЯ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ЭЛЕКТРОНОВ ПРИ КАНАЛИРОВАНИИ В ТОЛСТЫХ КРИСТАЛЛАХ

Л.И.Огнев

Предлагается модель расчета спектров излучения релятивистских электронов при каналировании в толстых монокристаллах с толщиной, значительно превышающей расстояние, на котором основная часть электронов уходит из режима каналирования. Расчет ширины линий квази-характеристического излучения выполнен в рамках метода комплексного потенциала для рассеяния на ядрах кристалла с учетом зонного уширения и доплеровского сдвига частоты вследствие расплывания углового распределения электронного пучка. Расчеты хорошо согласуются с результатами экспериментов с кристаллами кремния толщиной до 2.7 мм по форме спектров. Показано, что согласие абсолютной величины выхода излучения, получаемой в расчете с моделью равновзаселенных состояний связанного движения, с экспериментальными значениями может быть значительно улучшено, если учесть различную скорость деканалирования для каналированных и не захваченных в канал электронов.

Введение

Исследование излучения при каналировании релятивистских частиц в кристаллах [1] продолжает притягивать к себе интерес как с точки зрения возможности исследования свойств кристаллов [2,3], так и в качестве перестраиваемого источника рентгеновского излучения [4]. Несмотря на то что построенные к настоящему времени модели излучения каналированных частиц позволяют достаточно точно описывать форму спектра квазихарактеристического излучения в случае осевого [3] и рассчитывать ширину линий в случае плоскостного [5] каналирования, расчеты абсолютных значений спектров излучения в толстых мишенях не проводились. К тому же используемые модели расчетов спектра излучения каналированных частиц [3,5] требуют больших затрат машинного времени, что затрудняет их использование при исследовании свойств кристаллов. Существенное облегчение расчетов при хорошем согласии с экспериментом может быть достигнуто при использовании модели комплексного потенциала [6].

При рассмотрении процесса каналирования релятивистских электронов в монокристалле обычно предполагают, что состояние такого электрона в канале может быть описано суперпозицией квантовых состояний, соответствующих собственным значениям поперечной энергии [7]. Однако с ростом энергии рассеяние на нижних уровнях становится все более сильным, при этом столкновительная ширина уровней, в особенности в осевом канале, может превышать расстояние между соседними уровнями движения в отсутствие рассеяния. Следует при этом иметь в виду, что максимальное значение ширины уровней в таких кристаллах, как кремний, не превышает 25–30% от глубины ямы. Поэтому возникающий при перекрытии уровней режим каналирования не следует отождествлять с ускоренным деканалированием электронов.

Наиболее полное описание каналированных электронов может быть выполнено в рамках формализма матрицы плотности, например, в координатном представлении, что потребует решения уравнения, аналогичного уравнению Бете–Солпитера в теории переноса излучения [8]. Однако ряд результатов для процессов каналирования и излучения электронов в тонких кристаллах может быть получен с помощью статистически усредненной волновой функции, которая удовлетворяет уравнению Дайсона [8].

В работе [9] показано, что движение релятивистского электрона в кристаллическом потенциале $V(\mathbf{r})$ может быть описано уравнением типа уравнения Шредингера. В обозначениях работы [10] это уравнение для амплитуды $\psi(z, \mathbf{r}_\perp)$ волновой функции $\psi(z, \mathbf{r}_\perp) = \psi(z, \mathbf{r}_\perp) \exp(ik_z z)$ запишется в виде

$$2ik_z \partial \psi / \partial z + \Delta_\perp \psi = k_z^2 V'(z, \mathbf{r}_\perp) \psi(z, \mathbf{r}_\perp), \quad (1)$$

где $V'(z, \mathbf{r}) = V(z, \mathbf{r}) 2\gamma m_0 / \hbar^2 k_z^2$; k_z — волновой вектор вдоль оси z , совпадающей с направлением канала; m_0 — масса покоя электрона; γ — лоренц-фактор. При записи (1) предполагалось, что $|\partial^2 \psi / \partial z^2| \ll \ll k_z |\partial \psi / \partial z|$.

Будем предполагать, что рассеяние электронов происходит при взаимодействии с большим числом атомов, так что флуктуации потенциала δV имеют гауссово распределение. Оценка вероятности однократного рассеяния обсуждается в Приложении. Если продольный радиус корреляции флуктуаций кристаллического поля много меньше, чем характерное расстояние изменения амплитуды ψ , то для усредненной амплитуды $\langle \psi \rangle$ можно записать уравнение Дайсона в приближении δ -коррелированности флуктуаций [10]

$$2ik_z \partial \langle \psi \rangle / \partial z + \Delta_\perp \langle \psi \rangle - k_z^2 \langle V'(\mathbf{r}_\perp) \rangle \langle \psi \rangle - - ik_z^2 \left[\frac{k_z}{4} \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta V'(z, \mathbf{r}_\perp) \delta V'(z', \mathbf{r}_\perp) \rangle dz' \right] \langle \psi \rangle = 0, \quad (2)$$

где угловые скобки означают усреднение по статистике флуктуаций кристаллического поля.

Уравнение (2) описывает когерентную составляющую амплитуды волновой функции без учета ядерной отдачи. Следует отметить, что использование δ -коррелированности поля флуктуаций приводит к исчезновению дисперсии, т.е. таких явлений, как, например, сдвиг энергетических уровней. Однако поправка, вызванная дисперсией, составляет не более 1% [3]. Описание неупругих процессов рассеяния с возбуждением валентных электронов и электронов внутренних оболочек может быть выполнено в приближении 2-го порядка теории возмущений с использованием метода функций Грина. Вклад неупругих процессов электронного рассеяния в большинстве кристаллов, за исключением алмаза, в полное рассеяние не превышает 10%, поэтому в дальнейшем ограничимся рассмотрением квазиупругого рассеяния на ядрах мишени. Это значительно упрощает задачу, что весьма существенно для таких приложений, как исследование кристаллов по спектрам излучения при каналировании [2].

Для учета процессов обратного некогерентного захвата в канал рассеянных электронов в толстом кристалле необходимо рассматривать уравнение для функции когерентности или матрицы плотности в координатном представлении

$$\Gamma_2(z, \mathbf{r}_{11}, \mathbf{r}_{12}) = \langle \psi(z, \mathbf{r}_{11}) \cdot \psi^*(z, \mathbf{r}_{12}) \rangle.$$

Для упрощения записи значок \perp у двумерного вектора \mathbf{r}_\perp и поперечного лапласиана Δ_\perp будем опускать,

$$2ik_z \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_2(z, \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) + (\Delta_1 - \Delta_2) \Gamma_2(z, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + k_z^2 \left(\langle V'(\mathbf{r}_1) \rangle - \langle V'(\mathbf{r}_2) \rangle \right) \times \\ \times \Gamma_2(z, \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) - ik_z^2 \left[W'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) + W'(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2) - 2W'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right] \cdot \Gamma_2(z, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0. \quad (3)$$

В этом уравнении лапласианы Δ_1 и Δ_2 действуют соответственно на аргументы \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 функции Γ_2 . Начальные условия для уравнения (3) при влете электронов под углами α_x и α_y к оси канала относительно координатных плоскостей X и Y для пучка с угловыми ширинами $\Delta\alpha_x$ и $\Delta\alpha_y$ запишутся как

$$\Gamma_2(0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (\Delta k_x \Delta k_y / \pi) \cdot \exp \left\{ - [\Delta k(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)]^2 \right\} \cdot \exp [ik(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)],$$

где $\Delta k_{x,y} = \Delta\alpha_{x,y} k_z$.

В модели независимых колебаний атомов кристалла усредненная вдоль оси корреляционная сумма в уравнении (3) будет состоять из членов вида

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta V(0, \mathbf{r}_1) \delta V(z, \mathbf{r}_2) \rangle dz = \\ = \frac{2\pi}{d_z} \frac{1}{(2\pi)^4} \int (u_a)_{\mathbf{q}_1} \exp(i\mathbf{q}_1 \mathbf{r}_1) d^2 \mathbf{q}_1 \int (u_a)_{\mathbf{q}_2} \exp(-i\mathbf{q}_2 \mathbf{r}_2) d^2 \mathbf{q}_2 \times \\ \times \left\{ \exp \left[-\rho_x^2 (\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2)^2 / 2 \right] - \exp \left[-(\rho_x^2 / 2) [(\mathbf{q}_1)^2 - (\mathbf{q}_2)^2] \right] \right\}, \quad (4)$$

где ρ_x — однамерная амплитуда тепловых колебаний в проекции на координату x ; d_x — расстояние между атомами оси.

Потенциал отдельного атома u_a можно описать в виде аппроксимации Дойля–Тернера [11]. Следует однако отметить, что недостаточная точность аппроксимации при больших передачах импульса $\Delta q/4\pi \geq 2(\text{Å})^{-1}$, как показали расчеты для кристалла кремния, приводит к занижению потенциала рассеяния на 30–70%. Поэтому использовалась аппроксимация, предложенная в [12], где точность улучшена в диапазоне $2 \leq \Delta q/4\pi \leq 8(\text{Å})^{-1}$.

В принятой модели величина рассеивающего потенциала для выбранного кристалла зависит лишь от расстояния между атомами в цепочке. Поэтому соотношение между когерентной и рассеивающей составляющими потенциала в канале не зависит от осевого направления.

В плоскостном случае выражение (4) принимает вид

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \langle \delta V(0, \mathbf{r}) \delta V(z, \mathbf{r}') \rangle dz = \frac{N d_x}{(2\pi)^3} \int dq_y \cdot \int (u_a)_{q_x, q_y} \exp(iq_x x) dq_x \times \\ \times \int (u_a)_{q'_x, q_y} \exp(-iq'_x x') dq'_x \cdot \exp[iq_y(y - y')] \times \\ \times \left\{ \exp\left[-\rho_x^2(q_x - q'_x)^2/2\right] - \exp\left[-(\rho_x^2/2)[q_x^2 - (q'_x)^2 + 2q_y^2]\right] \right\}, \quad (5)$$

где N — плотность атомов в кристалле; d_x — расстояние между плоскостями.

В выражении (5) зависимость от координат y и y' , ориентированных вдоль плоскости канала, входит лишь в виде разности $(y - y')$ и определяет рассеяние вдоль плоскости. В уравнении для $\langle \psi \rangle$ в плоскостном канале зависимость от y полностью отсутствует. Нетрудно показать, что если не учитывать влияния кристаллических осей, то угловые распределения электронов вдоль плоскости каналирования имеют гауссову форму для каждого из состояний поперечного движения. В плоскостном случае соотношение между когерентной и рассеивающей компонентами потенциала также не зависит от выбранного направления в пределах применимости приближения изолированной плоскости.

Метод расчета собственных значений поперечной энергии с помощью уравнения (2) описан в работе [10]. Покажем, как с помощью уравнения (2) можно рассчитывать столкновительную ширину уровней.

Представим усредненную амплитуду волновой функции в виде суммы собственных состояний

$$\langle \psi \rangle = \sum_j C_j \varphi_j(\mathbf{r}_\perp) \exp(-izE_{\perp j}/\hbar c - z\beta_j/\hbar c), \quad (6)$$

где функции $\varphi_j(\mathbf{r}_\perp)$ удовлетворяют стационарному уравнению Шредингера с собственными значениями энергии $E_{\perp j}$

$$\Delta_\perp \varphi_j(\mathbf{r}_\perp) + \left[2k_z E_{\perp j}/\hbar c - 2\gamma m_0/\hbar^2 \cdot \langle V(\mathbf{r}_\perp) \rangle \right] \varphi_j(\mathbf{r}_\perp) = 0. \quad (7)$$

Подставив выражение (6) в уравнение (2) и умножив на $\varphi_n^*(\mathbf{r}_\perp) \times \exp(-izE_{\perp n}/\hbar c - z\beta_n/\hbar c)$, получаем после интегрирования по $d\mathbf{r}_\perp$ уравнение для медленно меняющихся амплитуд C_n

$$\begin{aligned}
 & 2ik_z C_n (-iE_{\perp n}/\hbar c - \beta_n/\hbar c) + \sum_j C_j \int \varphi_n^*(\mathbf{r}_\perp) \Delta_\perp \varphi_j(\mathbf{r}_\perp) d\mathbf{r}_\perp \times \\
 & \times \exp\left[-iz(E_{\perp j} - E_{\perp n})/(\hbar c - z\beta_n/\hbar c)\right] + k_z^2 (2\gamma m_0/\hbar^2 k_z^2) \times \\
 & \times \sum_j C_j \int \varphi_n^*(\mathbf{r}_\perp) \langle V(\mathbf{r}_\perp) \rangle \varphi_j(\mathbf{r}_\perp) d\mathbf{r}_\perp \cdot \exp\left[-iz(E_{\perp j} - E_{\perp n})/(\hbar c - z\beta_n/\hbar c)\right] + \\
 & + ik_z^2 (2\gamma m_0/\hbar^2 k_z^2) \sum_j C_j \int \varphi_n^*(\mathbf{r}_\perp) \left\{ (k_z/4) \cdot (2\gamma m_0/\hbar^2 k_z^2) \times \right. \\
 & \left. \times \int \langle \delta V(0, \mathbf{r}_\perp) \delta V(z', \mathbf{r}_\perp) \rangle dz' \right\} \cdot \varphi_j(\mathbf{r}_\perp) d\mathbf{r}_\perp \times \\
 & \times \exp\left[-iz(E_{\perp j} - E_{\perp n})/(\hbar c - z\beta_n/\hbar c)\right] = 0. \quad (8)
 \end{aligned}$$

Выражение в фигурных скобках не зависит от импульса электрона и имеет размерность энергии, поэтому его можно считать рассеивающим потенциалом (здесь $V(\mathbf{r}_\perp)$ размерная величина!)

$$V_{scat}(\mathbf{r}_\perp) \equiv (k_z/4) \cdot (2\gamma m_0/\hbar^2 k_z^2) \int \langle \delta V(0, \mathbf{r}_\perp) \delta V(z', \mathbf{r}_\perp) \rangle dz'. \quad (9)$$

Уравнение (8) содержит множители $\exp[-iz(E_{\perp j} - E_{\perp n})/\hbar c]$, быстроосциллирующие при $n \neq j$, которыми можно пренебречь, так как их вклад в окончательный результат мал. Поэтому с учетом уравнения (7) получаем

$$\beta_n = \int \varphi_n^*(\mathbf{r}_\perp) V_{scat}(\mathbf{r}_\perp) \varphi_j(\mathbf{r}_\perp) d\mathbf{r}_\perp$$

или в других обозначениях

$$\beta_n = (1/2\hbar c) \left\langle n \left| \int \langle \delta V(0, \mathbf{r}_\perp) \delta V(z', \mathbf{r}_\perp) \rangle dz' \right| n \right\rangle.$$

Осевое каналирование

Вид потенциала рассеяния V_{scat} в осевом канале кремния Si(111) при температуре 293 К приведен на рис. 1 штриховой линией. Из рисунка видно, что ширина рассеивающего потенциала значительно уже потенциала атомной цепочки. Следствием этого является значительное снижение рассеяния на ядрах для высоковозбужденных состояний каналированных электронов. Для состояний, близких ко дну ямы, наоборот, рассеяние велико. В качестве иллюстрации рассмотрим зависимость ширины двух нижних уровней от Лоренц-фактора γ в приближении двумерной параболической ямы $\langle V(\mathbf{r}_\perp) \rangle = \alpha |\mathbf{r}_\perp|^2$, где

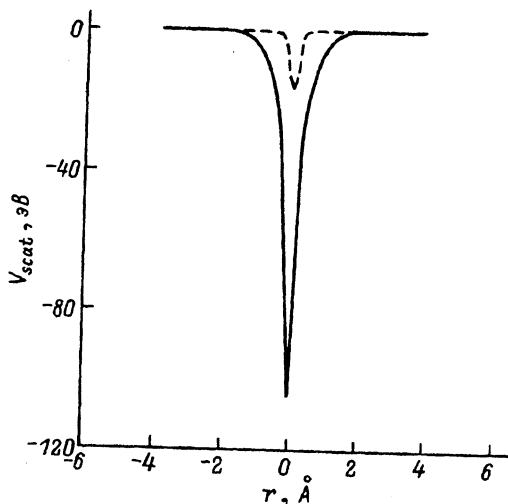


Рис. 1. Зависимость усредненного потенциала уединенной оси Si(111) (сплошная) и рассеивающего потенциала $V_{scat}(r)$ (штриховая линия) от расстояния от оси; температура кристалла равна 293 К.

в рассматриваемом случае константа α равна $\alpha = 800 \text{ эВ}/(\text{Å})^2$. Рассеивающий потенциал оси Si(111) будем аппроксимировать выражением $W(r_{\perp}) \approx W^{(111)} \exp(-r_{\perp}^2/2\rho_x^2)$, где $W^{(111)} = 16.6 \text{ эВ}$. Отсюда для основного состояния (или $1s$) и первого возбужденного состояния ($2p$) ширины уровней равны $2\langle 1s|W|1s \rangle \approx 2W^{(111)} [1 + (2\gamma\alpha m_0)^{-1/2}/2\rho_x^2]^{-1}$ и $2\langle 2p|w|2p \rangle \approx 2W^{(111)} [1 + (2\gamma\alpha m_0)^{-1/2}/2\rho_x^2]^{-2}$. Энергетическое расстояние между этими уровнями в системе покоя $\Delta E = (2\alpha/m_0)^{1/2}\gamma^{-1/2}$. Зависимости полных ширин уровней $1s$ и $2p$ и их суммы (ширина линии перехода $2p \rightarrow 1s$), а также расстояния между этими уровнями в системе покоя от лоренц-фактора γ представлены кривыми 1-4 на рис. 2. Звездочкой отмечена ширина линии перехода $2p \rightarrow 1s$ в системе покоя, полученная из экспериментального спектра излучения в работе [13]. Видно, что при $\gamma \geq 30$ суммарная ширина уровней превышает энергетическое расстояние между ними. При $\gamma \geq 1000$ ширина уровней асимптотически приближается к максимальной величине 33.2 эВ, что составляет около 28% глубины потенциала оси Si(111).

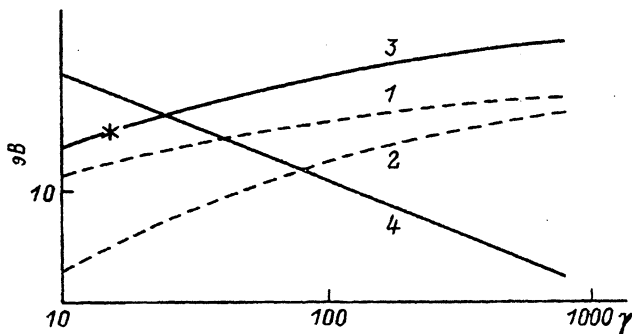


Рис. 2. Зависимость энергетической ширины в системе покоя электрона для уровней $1s$ (1), $2p$ (2), суммарной ширины $2p \rightarrow 1s$ (3) и расстояния между этими уровнями от лоренц-фактора γ в осевом канале Si(111).

Плоскостное каналирование

В плоскостном случае необходимо произвести усреднение выражения (9) по плоскости, направленной вдоль оси OY ,

$$\begin{aligned}
 V_{scat}(x) = & (k_z/4) (2\gamma m_0/\hbar^2 k_z^2) \frac{N d_x}{(2\pi)^3} \int dq_y \cdot \int (u_a)_{q_x, q_y} \exp(iq_x x) dq_x \times \\
 & \times \int (u_a)_{q'_x, q_y} \exp(-iq'_x x) dq'_x \exp[iq_y(y - y')] \times \\
 & \times \left\{ \exp\left[-\rho_x^2(q_x - q'_x)^2/2\right] - \exp\left[-(\rho_x^2/2) [q_x^2 - (q'_x)^2 + 2q_y^2]\right] \right\}. \quad (10)
 \end{aligned}$$

Вид зависимости $V_{scat}(x)$ от поперечной координаты x для плоскости Si(110) при температуре 293 К приведен на рис. 3 штриховой линией, масштаб увеличен в 10 раз. Выбрав аппроксимацию для потенциала рассеяния в виде $V_{scat}(x) \approx W^{(110)} \exp[-x^2/(2\rho_x^2)]$, где $W^{(110)} = 0.37$ эВ, в приближении параболического потенциала $\langle V(x) \rangle = \alpha x^2$, где $\alpha = 215$ эВ/(\text{Å})², для основного и первого возбужденного состояний получаем

$$\langle 0|W|0 \rangle = W^{(110)} \left[1 + (2\rho_x)^{-2} \hbar(2\gamma\alpha m_0)^{-1/2} \right]^{-1},$$

$$\langle 1|W|1 \rangle = W^{(110)} \left[1 + (2\rho_x)^{-2} \hbar(2\gamma\alpha m_0)^{-1/2} \right]^{-3}.$$

Полученные зависимости ширины уровней 0 и 1, их суммы и расстояния между уровнями в системе покоя приведены на рис. 4. Обозначения соответствуют использованным на рис. 2. Ширины линий, полученные из эксперимента [14], отмечены звездочками. Из рисунка

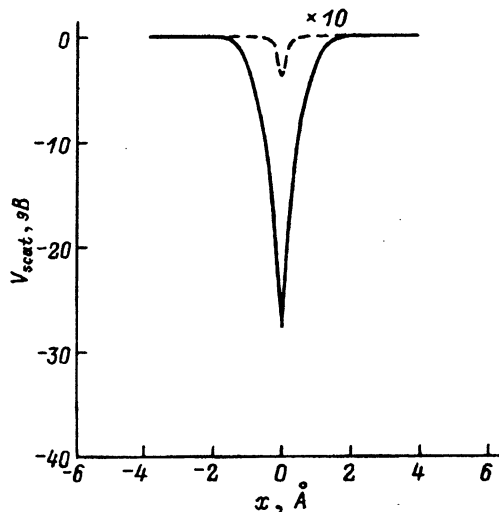


Рис. 3. Зависимость усредненного потенциала уединенной плоскости Si(110) (сплошная) и рассеивающего потенциала (штриховая линия) от расстояния до плоскости.

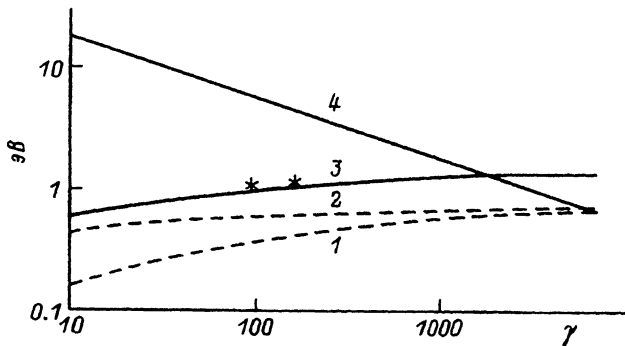


Рис. 4. То же, что и на рис. 2, но для уровней 0 и 1 в плоскостном канале Si(110).

видно, что суммарная ширина двух нижних уровней начинает превышать расстояние между ними при $\gamma \geq 2000$. При $\gamma \geq 3000$ ширина линии перехода $1 \rightarrow 0$ перестает зависеть от лоренц-фактора, достигая максимального значения при 1.4 эВ.

Из приведенных зависимостей следует, в частности, что во всех рассмотренных случаях ширина нижних уровней связанного движения каналированных электронов в монокристалле кремния, для которых рассеяние наиболее сильно выражено, значительно меньше, чем глубина потенциальной ямы усредненного потенциала. Поэтому деканалирование электронов непосредственно с нижних уровней маловероятно. Адекватное рассмотрение проблемы деканалирования электронов требует решения уравнения (3).

Рассмотрим теперь зависимость ширины уровня поперечного движения от лоренц-фактора при фиксированном значении поперечной энергии $E_{\perp j}$. Значение же номера уровня j будет возрастать с ростом лоренц-фактора. Для записи волновой функции будем использовать квазиклассическое приближение

$$\psi(x) = \sqrt{2} \left(\int_a^b \frac{dx}{p(x)} \right)^{-1/2} \sin \left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p(x) dx + \frac{\pi}{4} \right),$$

где $p(x) = [2\gamma m_0 (E_{\perp} - \langle U(x) \rangle)]^{1/2}$, a и b — точки поворота.

Отношение некогерентной ширины уровня к расстоянию до соседнего уровня дается выражением

$$2 \langle |W| \rangle / \Delta E_j = \sqrt{\gamma} \cdot \sqrt{2m_0} / \pi \hbar \int_a^b \frac{W(x) dx}{(E_{\perp j} - \langle U(x) \rangle)^{1/2}} \sim \sqrt{\gamma} \cdot \text{const}(E_{\perp j}).$$

При вычислении интегралов квадрат быстроосциллирующей функции заменялся ее средним значением. Таким образом, с увеличением энергии электронов граница, разделяющая периодическое и хаотическое движение электронов в шкале поперечных энергий E_{\perp} , перемещается все далее вверх. Однако при значениях лоренц-фактора $\gamma \geq 10^4$

периодический характер движения электронов в плоскостном канале преобладает. Аналогичный анализ может быть выполнен и для осевого каналирования, для которого разброс ширины уровней поперечного движения будет значительно большим и становится также зависимым от орбитального момента.

Расчет спектров излучения при плоскостном каналировании

Рассмотрим теперь, как полученные выше результаты могут быть использованы для расчетов абсолютных спектров излучения при плоскостном каналировании электронов с энергией 20–50 МэВ. Выражение для дифференциального выхода фотонов $d^2N/d\omega d\Omega$ для линии $i \rightarrow j$ при излучении в телесный угол $d\Omega$ может быть получено на основе формул работы [15]

$$\frac{d^2 N_{ij}}{d\omega d\Omega} = \frac{\omega(\omega_{ij})^2 4e^2(x_{ij})^2}{2\pi c^3} \left[\sin^2 \xi + \left(\frac{\cos v - \beta_{\parallel}}{1 - \beta_{\parallel} \cos v} \right) \cos^2 \xi \right] \times \\ \times \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{ij}}{[\omega(1 - \beta_{\parallel} \cos v) - \omega_{ij}]^2 + [\Gamma_{ij}/2]^2}, \quad (11)$$

где ω_{ij} и Γ_{ij} — частоты излучения фотонов и однородное уширение линии в системе покоя, $\beta = [(\gamma - 1)/\gamma]^{1/2}$, x_{ij} — дипольный элемент перехода $i \rightarrow j$.

Угол v соответствует углу между направлением вылета фотона и направлением движения электрона, угол ξ — азимутальному углу по отношению к плоскости каналирования. Ширина линии Γ_{ij} рассчитывалась для рассеяния электронов на ядрах атомов мишени через полуширины уровней β_i и β_j

$$\Gamma_{ij} = 2(\beta_i + \beta_j).$$

С учетом углового распределения электронного пучка $f(v, z)$ в плоскости каналирования на глубине z форма линии излучения вперед $d^2N/d\omega d\Omega$ для детектора с малой угловой апертурой $\Delta v \ll \gamma^{-1}$ определяется выражением

$$\frac{d^2 N_{ij}}{d(\hbar\omega) d\Omega} = \alpha \frac{\omega \tilde{\Gamma}_{ij}(x_{ij})^2}{2\gamma^2 \pi^2 c^3} \int_0^L dz n_i(z) \int_{-\pi}^{\pi} dv f(z, v) \times \\ \times \frac{1}{\left[\frac{\omega}{\tilde{\omega}_{ij}} \frac{1 - \beta_{\parallel} \cos v}{1 - \beta_{\parallel}} - 1 \right]^2 + \left[\tilde{\Gamma}_{ij}/2\omega_{ij} \right]^2}, \quad (12)$$

где $\tilde{\omega}_{ij} = 2\gamma^2 \omega_{ij}$ и $\tilde{\Gamma}_{ij} = 2\gamma^2 \Gamma_{ij}$.

В пренебрежении влиянием осевых эффектов угловое распределение электронов вдоль плоскостей имеет гауссову форму

$$f(z, v) = (v_g \pi)^{-1} \exp(-v^2/v_g^2). \quad (13)$$

Учитывая интенсивные переходы электронов между различными состояниями поперечного движения, можно полагать, что угол v_g одинаков для всех состояний. В качестве первого приближения угол v_g может быть выбран равным углу многократного рассеяния в аморфной мишени

$$v_g(z) = (21/E)(z/L_{rad})^{1/2},$$

где L_{rad} — радиационная длина.

С учетом конечности толщины кристалла к однородной ширине уровня добавляется "пролетное уширение" $\Delta\omega = 2\pi\hbar c/L$. Для кристаллов с толщинами более 20 мкм этот эффект несуществен.

Учитывая, что вероятность деканалирования электронов с нижних уровней мала, естественно предположить, что в результате малоуглового рассеяния электронов в канале устанавливается квазиравновесие электронов по состояниям, при котором происходит лишь отток в область больших поперечных энергий. При расчете спектров излучения часто предполагают равномерность состояний связанного движения электронов [16]. Поскольку угловая ширина состояния связанного движения в импульсном пространстве приблизительно равна зоне Бриллюэна, то населенность связанного уровня равна

$$C_i(z) \approx \frac{1}{n} \int_{-\alpha_L}^{\alpha_L} f(z, v) dv, \quad (14)$$

где n — число связанных электронов в канале, α_L — критический угол Линдхарда.

Собственные значения поперечной энергии уровней связанного движения электронов рассчитываются для периодического потенциала плоскостей кристалла, тогда как рассеяние на ядрах рассчитывается в приближении уединенной плоскости (10), так как потенциал рассеяния быстро убывает.

Спектры излучения электронов с энергией 54 МэВ при каналировании вдоль плоскостей (100) в монокристаллах кремния толщиной 19,130 и 2765 мкм, рассчитанные с помощью формул (12)–(14), представлены на рис. 5–7. Видно, что форма спектра хорошо воспроизводится для всех трех толщин. Доплеровский сдвиг частоты фотонов вызывает скошенность формы линии и наклон линии со стороны меньших энергий является менее крутым, чем со стороны высоких энергий. При этом положение верхушек пиков одинаково для всех трех толщин мишеней. Это обстоятельство очень важно для таких приложений, как нахождение свойств кристаллов по спектрам излучения [2,3].

Хотя рассчитанная интенсивность пиков излучения примерно в 3 раза превышает экспериментальную, зависимость от толщины мишеней z , как и в эксперименте, $\sim \log(z)$ (рис. 8). Согласие с экспериментом может быть значительно улучшено, если учесть, что в условиях квазиравновесия населенность состояния C_i обратно пропорциональна вероятности перехода во все другие состояния [17]. На больших глубинах каналированные электроны составляют лишь небольшую часть, и с учетом нормировки населенности получаем асимптотику [18]

$$C_i(z) \sim \frac{\beta_{pl}}{n\beta_i} \int_{-\alpha_L}^{\alpha_L} f(z, v) dv, \quad (15)$$

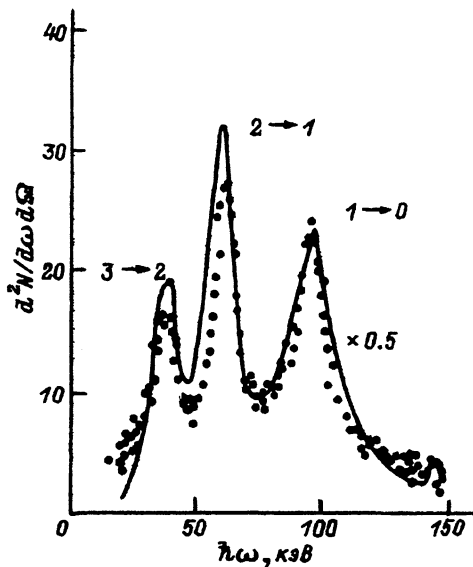


Рис. 5. Экспериментальные спектры [16] излучения электронов с энергией 54 МэВ при плоскостном каналировании в монокристалле Si(110) с толщиной 19 мкм (кружки) и рассчитанные в модели малоуглового рассеяния (сплошная линия) (для удобства сравнения введен уменьшающий коэффициент 0.5) в единицах 10^{-3} фотон/(эл.·ср.·кэВ).

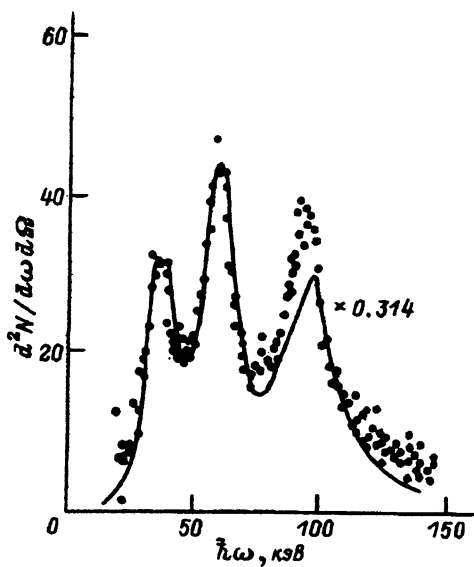


Рис. 6. То же, что и на рис. 5, но для толщины 130 мкм; уменьшающий коэффициент 0.314.

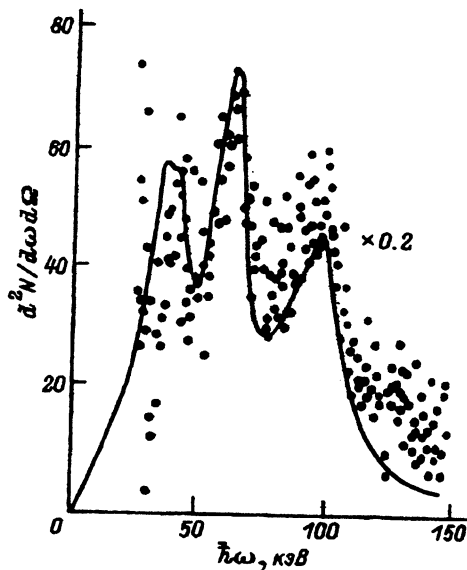


Рис. 7. То же, что и на рис. 5, но для толщины 2765 мкм; уменьшающий коэффициент 0.2.

где β_{pl} соответствует плоской волне.

Эта модель аналогична приближению сильных столкновений в молекулярной физике.

Полученные для асимптотической модели (15) значения интенсивности пика $1 \rightarrow 0$ приведены на рис. 8 сплошной линией. Уменьшение интенсивности пика объясняется тем, что на глуболежащем уровне 1 рассеяние сильнее, чем в аморфной мишени. Отметим, что в случае

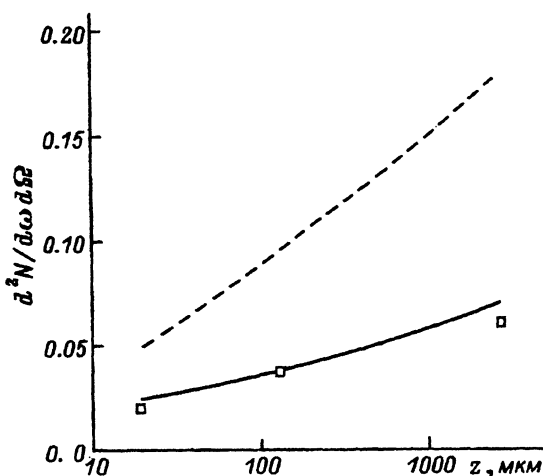


Рис. 8. Зависимость от толщины мишени интенсивности пика $1 \rightarrow 0$ излучения электронов с энергией 54 МэВ в монокристалле кремния Si(100) в единицах фотон/(эл.·ср·кэВ), рассчитанная в модели малоуглового рассеяния ("аморфная кинетика") (штриховая линия), асимптотическая модель квазиравновесия (сплошная линия). Экспериментальные данные [16] представлены квадратами.

электронов с энергией 16.9 МэВ высота пика в модели равнозаселенных уровней связанного движения (14), напротив, в 1.3 раз меньше, чем экспериментальная. В этом случае имеются только два связанных состояния, а верхний уровень 1 соответствует области квазиканалирования, где рассеяние понижено по сравнению с аморфной мишенью, и электроны дольше задерживаются на этом уровне.

Заключение

Развита теория многократного рассеяния релятивистских электронов в осевых и плоскостных каналах монокристаллов при соударениях с ядрами, удобная для численных расчетов. Получены уравнения для динамики волновой функции $\langle \psi \rangle$ и функции когерентности $\langle \psi \psi^* \rangle$, усредненных по статистике флуктуаций кристаллического потенциала. Показано, что соотношение между когерентной и рассеивающей составляющими усредненного потенциала в кристалле определяется лишь его свойствами и не зависит от выбора направления как осевого, так и плоскостного каналирования. Впервые исследована зависимость ширин нижних уровней поперечного движения электронов в каналах Si(111) и Si(110) от лоренц-фактора в пределах $10 \leq \gamma \leq 10^4$. Модель кинетики каналированных электронов на основе многократного рассеяния хорошо воспроизводит основные особенности экспериментальных спектров в толстых мишенях. Рассеяние электронов вдоль плоскости не приводит к заметному сдвигу положения вершин пиков линий квазихарактеристического излучения. Абсолютная интенсивность пиков имеет ту же зависимость от толщины кристаллических мишеней, что и в измеренных спектрах.

Автор благодарит В.В.Белошицкого за многочисленные плодотворные обсуждения полученных результатов.

Оценку вероятности однократного рассеяния каналированных электронов можно произвести по формуле $\sigma(v_s)N_{Si}^*l$, где $\sigma(v_s)$ — вероятность резерфордовского рассеяния на углы, большие минимального угла однократного рассеяния v_s ; N_{Si}^* — плотность ядер в центральной области осевого канала с шириной $|r_{\perp}| \leq \rho$; $l \approx \rho/v_s$ — длина пути электрона в области повышенной плотности ядер в центре канала. Угол v_s находим из соотношения $\sigma(v_s)N_{Si}^*l \approx 1$; отвечающего безусловной вероятности однократного рассеяния электрона при пролете через центр канала. Поскольку $\sigma(v_s) = 4\pi Z^2 e^4 / (\gamma^2 m_0^2 c^4) \cdot (1/v_s^2)$, то

$$v_s = \frac{2}{\gamma^{2/3}} \left(\frac{\rho N_{Si}^* \pi Z^2 e^4}{m_0^2 c^4} \right)^{1/3} \approx 0.0124 \gamma^{-2/3}.$$

Из полученного соотношения следует, что угол v_s уменьшается быстрее, чем критический угол Линдхарда $v_L \sim \gamma^{-1/2}$ (при $\gamma = 100$, $v_s \approx 0.3v_L$). Сечение же однократного рассеяния $\sigma(v_s)$ убывает как $\gamma^{-2/3}$. Связывая с однократным рассеянием энергетическую ширину состояния ΔE , нетрудно показать, что $\Delta E \approx 6$ эВ при $\gamma = 100$. Это почти на порядок меньше рассчитанной ширины линии $2p \rightarrow 1s$.

Список литературы

- [1] Kumakhov M.A. // Phys. Lett. 1976. Vol. A57. N 1. P. 17–18.
- [2] Огнев Л.И. // УФН. 1988. Т. 154. № 4. С. 691–702.
- [3] Hau L.V., Lagsgaard E., Andersen J.U. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 1990. Vol. B48. P. 244–247.
- [4] Richter A. // Mater. Sci. and Eng. 1992. Vol. B11. P. 139–147.
- [5] Буреников А.Ф., Дудчик Ю.И., Комаров Ф.Ф. // ЖТФ. 1985. Т. 55. Вып. 11. С. 2184–2190.
- [6] Ognev L.I. // Rad. Eff. and Def. in Solids. 1993. Vol. 25. P. 81–87.
- [7] Andersen J.U., Andersen S.K., Augustyniak W.M. // Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 1977. Vol. 39. N 10.
- [8] Holy V., Gabrielyan K.T. // Phys. St. Sol. 1987. Vol. 140. N 1. P. 39–50.
- [9] Lervig Ph., Lindhard J., Nielsen V. // Nucl. Phys. 1967. Vol. A96. N 3. P. 489–504.
- [10] Дабагов С.Б., Огнев Л.И. // ЖТФ. 1988. Т. 58. Вып. 9. С. 1696–1701.
- [11] Doyle P.A., Turner P.S. // Acta Cryst. 1968. Vol. A24. Pt 3. P. 390–397.
- [12] Andersen J.U., Bonderup E., Lagsgaard E. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 1982. Vol. 194. N 1–3. P. 209–224.
- [13] Lotz W., Genz H. et al. // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. 1990. Vol. B48. P. 256–259.
- [14] Gouanere M., Sillou D., Spighel M. et al. // Phys. Rev. B. 1988. Vol. 38. N 7. P. 4352–4371.
- [15] Белошицкий В.В., Кумахов М.А. // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. Вып. 4. С. 1244–1256.
- [16] Kephart J.O., Pantell R.H., Berman B.L. et al. // Phys. Rev. B. 1989. Vol. 40. N 7A. P. 4249–4263.
- [17] Белошицкий В.В., Огнев Л.И. ЖТФ. 1986. Т. 56. Вып. 3. С. 1786–1790.
- [18] Ognev L.I. // Preprint IAE-5594/11. Moscow, 1992.

Российский научный центр
“Курчатовский институт”
Москва

Поступило в Редакцию
31 мая 1993 г.